

prof dr hab **Władimir Tomi**
Instytut Fizyki Akademii Pomorskiej w Słupsku

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr **Justyny Jadwigi Meler**
„Wpływ składników wód naturalnych na absorpcję światła w Bałtyku i jeziorach Pomorza”

Recenzowana rozprawa doktorska jest pracą z zakresu oceanologii fizycznej i wykonana w Zakładzie Fizyki Morza (Pracownia Optyki Morza) Instytutu Oceanologii Polskiej Akademii Nauk. Praca dotyczy opracowania i weryfikacji nowych wieloskładnikowych modeli obliczenia absorpcji wód morskich uwzględniających obecność innych, poza chlorofilem, składników, których właściwości optyczne zmieniają się wraz z ich właściwościami chemicznymi i fizycznymi. Nowe modele są niezbędne do postępu metod teledetekcji satelitarnej w odniesieniu do akwenów południowego Bałtyku i jezior Pomorza. Podjęty temat wpisuje się w główny nurt współczesnych badań Bałtyku i stworzenia operacyjnej satelitarnej kontroli podstawowych charakterystyk morskich akwenów.

Do zrealizowania założonych celów pracy niezbędne były analizy bardzo obszernego materiału empirycznego, reprezentatywnego zarówno dla akwenów morskich południowego Bałtyku, jak i wód jezior pomorskich. W pracy analizowano dane empiryczne zgromadzone z udziałem autorki podczas: 23 rejsów r/v „Oceania” po Bałtyku, 78 lokalnych eksperymentów na molo w Sopocie, 96 wypraw na jeziora Pojezierza Pomorskiego. Uzyskany tam materiał pomiarowy a w konsekwencji wyniki są niezwykle cenne. Oprócz własnych materiałów autorka wykorzystwała bogatą bazę danych empirycznych zgromadzonych przez zespoły Zakładu Fizyki Morza IO PAN oraz Zakładu Fizyki Środowiska IF Akademii Pomorskiej w Słupsku. Materiał ten zgromadzono podczas rejsów naukowo-badawczych głównie w rejonie południowego Bałtyku, a także wypraw na pomorskie jeziora.

Praktyczna cenność pracy wiąże się z zastosowaniem opracowanego materiału w projekcie Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka: POIG.01.01.02-22-011/09 Satelitarna Kontrola Środowiska Morza Bałtyckiego (SatBałtyk)

Rozprawa liczy 207 stron, w tym 177 stron tekstu zasadniczego, zawartego w pięciu rozdziałach i wnioskach. Problem badawczy omawiany i dyskutowany jest w oparciu o 204 pozycje literatury i bogatą dokumentację w postaci 79 rysunków, wykresów oraz 30 tabel. Układ pracy jest logiczny, przejrzysty i zrozumiały.

We wstępie autorka podaje założenia, cele i zakres pracy. Główne dwa cele sformułowane:

1. Ustalenie i zweryfikowanie związków matematycznych lub statystycznych prawidłowości pomiędzy absorpcyjnymi właściwościami zawiesin i substancji rozpuszczonych w badanych akwenach a ich podstawowymi właściwościami fizycznymi i biogeochemicznymi.
2. Sformułowanie na podstawie opracowanych związków matematycznych odpowiedniego dla badanych akwenów 2-go rodzaju, półempirycznego modelu sumarycznych właściwości absorpcyjnych wód rejonów brzegowych południowego Bałtyku i jezior Pojezierza Pomorskiego.

W pierwszym rozdziale zrobiony pełny przegląd głównych absorbentów światła słonecznego występujących w akwenach naturalnych: czystej wody, rozpuszczonych substancji organicznych, zawiesin organicznych i nieorganicznych. Całkowity współczynnik absorpcji traktuje się jako suma odpowiednich charakterystyk dla molekuł wody i ich asocjantów, rozpuszczonych substancji organicznych, zawiesin w wodzie, cząstek minerałów, cząstek organicznych, komórek fitoplanktonu i bakterii. Dla wszystkich wymienionych składników w rozdziale podano widma

absorpcji. W drugim rozdziale rozprawy, który też zawiera materiał przeglądowy, są rozpatrywane przez autorkę widma absorpcyjne głównych grup składników wód naturalnych dla różnych morskich akwenów i ich modelowe opisy zaproponowane w pracach znanych grup badawczych.

W tym rozdziale, w p. 2.1 przedstawiono przegląd eksperymentalnych właściwości absorpcyjnych obserwowanych w naturze, odnoszących się już nie do indywidualnych widm absorpcji przez poszczególne substancje, lecz przez trzy główne szerokie ich grupy, a mianowicie organiczne substancje rozpuszczone, ogół substancji zawieszonych oraz wodę. Scharakteryzowano także oddzielnie widma absorpcji głównych substancji zawieszonych, to jest fitoplanktonu i cząstek niealgalnych.

Uwzględnione tu zostały dane literaturowe oraz banki danych IO PAN i IF Akademii Pomorskiej w Słupsku. Podany bogaty materiał i interpretacja widm jest potrzebna dla dalszego zrozumienia podstawowego materiału dysertacji. Skomentowany dokładnie różne statystyczne i modelowe opisy uwzględniające wpływ składników wód naturalnych na ich właściwości absorpcyjne mają cenność jako materiał referencyjny. Najpierw przeanalizowano podstawowe statystyczne opisy widm absorpcji światła przez rozpuszczone substancje organiczne, takie jak: modele „klasyczne” wykorzystujące parametr nachylenia widma, modele wg Stedmon i Markager (2001,2006), Kowalczuka (2006) i Morela(2009.) Następnie w tym rozdziale zaprezentowane są modelowe opisy (podrozdział 2.2) widm absorpcji światła przez fitoplankton: model wg: Woźniak i Ostrowska (1990), Bricaud i in. (1995), Bidigare i in. (1990), Woźniak i in. (1998, 1999, 2000), Majchrowski (2001), Ficek i in. (2003). W następnych podrozdziałach są modelowe opisy widm absorpcji światła przez fitoplankton oraz przez cząstki niefitoplanktonowe: parametryzacja Bricaud i in. (1998) dla wód rodzaju pierwszego; modelowanie absorpcji przez cząstki mineralne wg Bowers i Binding (2006); opis absorpcji przez fitoplankton i składniki niefitoplanktonowe wg Zheng i Stramski (2013a); opis absorpcji światła przez cząstki zawieszane wg Zheng i Stramski (2013b) i niektóre inne modelowe opisy właściwości absorpcyjnych wód pierwszego i drugiego rodzaju. Atutem tego rozdziału jest przedstawienie statystycznych oraz modelowych półempirycznych opisów matematycznych, umożliwiających systematyzację widm absorpcji i ich dalsze modelowanie. Prezentowane w poprzednich podrozdziałach wyniki eksperymentalnych pomiarów współczynników absorpcji światła przez składniki naturalne w akwenach naturalnych oraz statystyczne i modelowe opisy tych właściwości dotyczyły przeważnie wód 1-ego rodzaju. Poważnym problemem jest to, że w wodach 2-ego rodzaju właściwości absorpcyjne tych składników są nieco inne.

Rozdział 3 zawiera charakterystykę materiału empirycznego, stosowaną metodykę i technikę przeprowadzonych badań. Osiągnięcie założonych przez autorkę celów wymagało przeprowadzenia wieloletnich badań eksperymentalnych oraz analizę rezultatów. Wykorzystane w tej pracy niezbędne dane empiryczne, zostały zebrane w okresie sześcioletnim (2006 - 2011) przez autorkę oraz współpracowników z IO PAN i IF AP. W ciągu tych lat autorka przemierzyła kilkaset widm absorpcji światła przez poszczególne składniki wód naturalnych. Równolegle wyznaczone były także wybrane parametry biogeochemiczne analizowanych próbek wody, m.in. stężenia masowe zawartych w nich zawiesin oraz chlorofilu *a*.

Ostatnimi czasy bardzo popularne do oceny stanu środowiska stały się metody teledetekcyjne. W związku z tym ważne jest dobre rozpoznanie udziału składników wód naturalnych w procesie absorpcji światła przez te składniki, w celu stworzenia efektywnych algorytmów. Autorka stara się wyjść naprzeciw tym oczekiwaniom, jeśli chodzi o wody południowego Bałtyku i wybranych jezior Pomorza. Rozpoznanie proporcji udziału każdego ze składników w pochłanianiu światła może służyć do optycznej identyfikacji stężeń tych składników dla danego akwenu. Zmiany tych proporcji w absorpcji światła odzwierciedlają również dynamikę procesów produkcji i ubywania tych składników. W kolejnych częściach tego rozdziału scharakteryzowano pokrótce regiony, w których przeprowadzone były pomiary, przedstawiono specyfikację zebranego materiału

empirycznego, oraz przedstawiono metody pomiarowe wykorzystane do wyznaczenia parametrów optycznych i biogeochemicznych analizowanych w pracy. Ten rozdział jest najkrótszy w pracy ok. 15 stron ale zawiera podstawowe informacje niezbędne do zrozumienia następnego rozdziału.

Rozdział czwarty jest największym w pracy (58 stron) i poświęcony analizie zależności pomiędzy absorpcją światła przez składniki wód a parametrami biogeochemicznymi takimi jak stężenie masy zawiesin i jej frakcji organicznej i nieorganicznej, stężenie chlorofilu *a*, suma stężeń pigmentów akcesoryjnych, absorpcja przez rozpuszczone substancje organiczne. Przedstawiono własne wyniki badań i analiz statystycznych dotyczących udziału poszczególnych składników wód naturalnych w pochłanianiu światła w wodach analizowanych akwenów.

Budżet absorpcji światła w akwenach 2-ego rodzaju przedstawiono w podrozdziale 4.1, rezultaty pozwoliły wnioskować, że praktycznie w sumarycznej absorpcji światła zarówno w wodach Bałtyku Południowego jak i jeziorach Pomorza dominuje absorpcja światła przez organiczne substancje rozpuszczone. Z danych widać również ogromną różnorodność w proporcjach absorpcji światła dla indywidualnych prób, szczególnie w przypadku fal długich.

Kolejny podrozdział 4.2 przedstawia analizy, których celem było znalezienie zależności pomiędzy absorpcją światła poszczególnych składników wód a równolegle wyznaczanymi parametrami biogeochemicznymi. Opis modelowych zależności współczynników absorpcji światła przez fitoplankton oraz właściwych współczynników absorpcji światła przez fitoplankton od stężenia chlorofilu *a*, przedstawiono w p. 4.2.1. W tym modelowym opisie uwzględniono następnie wpływ pigmentów akcesoryjnych na absorpcję światła przez fitoplankton, p. 4.2.2. Do ważnych rezultatów można liczyć to, że na podstawie tych analiz opracowano model absorpcji światła przez cząstki niefitoplanktonowe w badanych wodach 2-ego rodzaju. Prezentowany dwuparametryczny model absorpcji światła przez fitoplankton (podrozdział 4.2), skonstruowany przez autorkę, pozwala wyznaczać współczynniki absorpcji światła na podstawie zmierzonych stężeń chlorofilu *a* oraz stężeń pigmentów akcesoryjnych bez potrzeby bezpośredniego mierzenia współczynników absorpcji, np. metodą spektrofotometryczną. To znaczy, że i odwrotne zagadnienie może być rozwiązane za pomocą tego modelu. Czynniki błędów waha się w przedziale 1.28-1.69 co jest całkiem niezłym rezultatem dla takich kilkuparametrycznych zagadnień.

W kolejnych rozdziałach 4.3 i 4.4 dokładnie przeanalizowano wpływ cząstek niefitoplanktonowych oraz substancji organicznych rozpuszczonych na absorpcję światła w akwenach 2-ego rodzaju. Autorka stworzyła model dwuskładnikowy, uwzględniający podstawowy podział tych zawiesin niefitoplanktonowych na frakcję organiczną i nieorganiczną i model ten pozwolił wyznaczać te frakcje ilościowo. Cennym rezultatem jest to, że przedstawiony model absorpcji światła przez cząstki niefitoplanktonowe, wzór (4.6), pozwala wyznaczać współczynniki absorpcji, na podstawie zmierzonych stężeń masowych cząstek zawieszonych oraz stężeń masowych frakcji nieorganicznej zawiesin, bez konieczności bezpośredniego mierzenia współczynników absorpcji.

Zaprezentowane w tym rozdziale zależności posłużyły następnie do skonstruowania dwóch alternatywnych modeli sumarycznej absorpcji światła w wodach naturalnych przedstawionych w rozdziale 5. W części tej uwaga autorki skupiona jest na półempirycznych wzorach sumarycznej absorpcji światła w wybranych akwenach rodzaju 2-ego.

Modele te opisane zostały w dwu kolejnych rozdziałach (5.1.1 i 5.1.2) Przedstawiono tam także rezultaty oceny błędów przeprowadzonej estymacji. Oceny tej dokonano przez porównanie wartości współczynników absorpcji obliczonych przy wykorzystaniu otrzymanych wzorów modelowych z wartościami pomierzonymi tych współczynników, na podstawie których modele zostały opracowane. Natomiast wyniki eksperymentalnej weryfikacji modeli przeprowadzonej na niezależnym (tj. nie wykorzystanym do opracowania modelowych zależności) materiale empirycznym, polegające na ocenie błędów wartości współczynników estymowanych z

wykorzystaniem wzorów modelowych w stosunku do ich wartości pomierzonych są zaprezentowane w rozdziale 5.2. Te dwa proste przedstawione w pracy modele sumarycznej absorpcji pozwalają wyznaczać absorpcję całkowitą w wodach rodzaju 2-ego w strefie powierzchniowej, na podstawie danych o stężeniach chlorofilu *a* i sumarycznych stężeń pigmentów akcesoryjnych, oraz danych o stężeniach masowych materii zawieszanej i jej frakcji nieorganicznej. W przypadku drugiego modelu, dodatkowym parametrem jest wartość współczynnika absorpcji przez organiczne substancje rozpuszczone w wodzie dla długości fali 400 nm.

W rezultacie przeprowadzonej przez autorkę rzetelnej weryfikacji stwierdzono, że błąd logarytmiczny waha się od -33% do +49% dla przedziału 350 - 750 nm. Natomiast standardowy czynnik błędów waha się od 1.07 - 1.49. Podobnie jak dla modelu opisanego wzorem (5.2) zależnego od stężenia chlorofilu *a* rozkład gęstości prawdopodobieństwa przypomina rozkład Gaussa (rys. 5.11). W przedziale długości fal 350 - 750 nm błąd systematyczny waha się w przedziale od 6.5% do 59%. Z porównania tabel 5.4 i 5.5 wynika, że błędy dla opracowanych modeli, tj. cztero- i pięcioparametrowego są tego samego rzędu. Weryfikacje skonstruowanych wzorów (5.2) i (5.4) przeprowadzone na niezależnym banku danych empirycznych pokazują że obydwa modele spełniają warunki umożliwiające ich stosowanie w oceanologii i prawdopodobnie do analizy niektórych innych wieloskładnikowych układów.

W podsumowującej części autorka przedstawiła 6 wniosków z rezultatów swych badań. Moim zdaniem, ważniejszy wniosek to, że wartości sumarycznych współczynników absorpcji światła w wodach zbadanych akwenów można estymować na podstawie znanych stężeń i właściwości biogeochemicznych optycznie aktywnych składników tych wód za pomocą opisanych w tej pracy modeli: czteroparametrowego (równanie (5.2)) lub pięcioparametrowego (równanie (5.4)). Opracowane modele cząstkowej i sumarycznej absorpcji światła przez składniki wód 2-ego rodzaju mogą zostać wykorzystane między innymi do doskonalenia algorytmów zdalnego określania parametrów charakteryzujących stan i funkcjonowanie ekosystemu w obszarze południowego Bałtyku i jezior Pomorskich. Mogą być one z powodzeniem stosowane na przykład w badaniach monitoringowych, kiedy istnieje potrzeba szybkiej i przybliżonej oceny widm absorpcji światła. Można przypuszczać, że przedstawione w pracy modele sprawdzą się dla innych wód 2-rodzaju. Postęp teledetekcji w odniesieniu do tych akwenów jest zatem bezpośrednio uwarunkowany rozwojem wieloskładnikowych modeli optycznych morza uwzględniających obecność optycznie aktywnych składników, których właściwości optyczne nawet w obrębie jednej grupy zmieniają się wraz z ich zróżnicowanymi właściwościami chemicznymi i fizycznymi i są obecnie słabo rozpoznane. Z tego punktu widzenia rezultaty dysertacji uważam za bardzo cenny wkład w oceanologię fizyczną i można stwierdzić, że założone na początku dysertacji cele pracy zostały zrealizowane.

Do zrealizowania założonych celów pracy niezbędne były analizy bardzo obszernego materiału empirycznego, reprezentatywnego zarówno dla akwenów morskich południowego Bałtyku, jak i wód jezior pomorskich. Autorka wykorzystwała bazę danych empirycznych zgromadzoną podczas wieloletnich badań przeprowadzonych z jej aktywnym udziałem przez zespoły Zakładu Fizyki Morza IO PAN w Sopocie oraz Zakładu Fizyki Środowiska IF Akademii Pomorskiej w Słupsku. Materiał ten zgromadzono podczas rejsów naukowo-badawczych głównie w rejonie południowego Bałtyku, a także wypraw na pomorskie jeziora. Z dużą przyjemnością dostrzegłem też wkład naszego Instytutu Fizyki ze Słupska do powstania niniejszego doktoratu. Baza danych, stworzona przez dr hab. Dariusza Ficka w oparciu szeroko zakrojone wieloletnie badania jezior Pomorza została szeroko wykorzystana dla opracowania algorytmów zaproponowanych w IO PAN przez autorkę w grupie naukowej profesorów Bogdana Wozniaka i Mirosławy Ostrowskiej.

Niektóre uwagi krytyczne: można było by ściślej i jaśniej podać w pierwszym rozdziale wyjaśnienie mechanizmów absorpcji wody i kształty widm z zastosowaniem poziomów elektrono-

oscylacyjno-rotacyjnych energii molekuł wody, tworzenia klastrów i międzymolekularnych oddziaływań.

Pomiar absorpcji nie jest trudnym zagadnieniem, jak to napisane na str. 18 „Mechanizm pochłaniania światła przez czystą chemiczną wodę i czystą wodę morską jest zagadnieniem dobrze poznanym teoretycznie, choć trudnym do badania”

Cennym dla pracy byłoby omówienie możliwych mechanizmów oddziaływania składników wód, i ewentualnego ich wpływu na widma. Prawdopodobnie i efekt upakowania, o którym kilkakrotnie wspomniano w pracy (na prz. str. 52) i słabsza zależność absorpcji chlorofilu od jego stężenia (str 52 drugi paragraf), ma związek z tymi efektami.

Niezbyt szczęśliwie dobrano skrót dla określenia wód drugiego rodzaju (case water 2) – „WC2”

Warto także zdecydować się na jeden termin określający jeden z rodzajów zawiesiny, albo cząstki niealgalne, albo cząstki niefitoplanktonowe.

Przy analizach współczynnika absorpcji światła przez CDOM autorka niepotrzebnie wchodziła tak daleko w zakres UV (aż do 200nm). Z promieniowaniem o takiej długości fali praktycznie nie mamy do czynienia w procesach indukowanych światłem słonecznym.

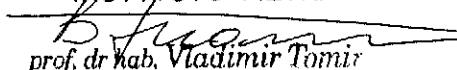
Przedstawiona dysertacja jest kompletna i rzeczowa, napisana zrozumiałym, przejrzystym językiem. Kilka uchybień językowych lub niezręcznych sformułowań (np. na str 15 ”molekułę wody tworzy atom tlenu, który przyciąga do siebie dwa atomy wodoru”; str. 16 ‘kombinacja oddziaływań wewnątrz-molekularnych’- tu lepiej mówić o klasteryzacji molekuł) i zauważalna ilość usterek edytorskich dostrzeżonych w pracy nie obniżają jej wartości.

Recenzowana rozprawa jest interdyscyplinarnym, i oryginalnym studium z wykorzystaniem szeregu nowoczesnych metod pomiarowych w badaniach na akwenach morskich i technik modelowania procesów fizycznych. Kandydatka nie tylko udokumentowała w pracy swoje rozległe umiejętności badawcze i kompetencje ale także uzyskała w skali międzynarodowej cenne wyniki. Wyniki postawione w pracy mają ogromną wartość poznawczą i naukową i można mieć nadzieję, że znajdą się w przyszłych publikacjach Autorki.

Jestem przekonany, że przedstawiona rozprawa spełnia warunki określone w Ustawie o Tytule i Stopniach Naukowych dla rozpraw doktorskich i wnioskuję o dopuszczenie mgr Justyny Jadwigi Meler do dalszego etapu przewodu doktorskiego.

Słupsk, 30 lipca 2014

DYREKTOR
INSTYTUTU FIZYKI



prof. dr hab. Vladimir Tomir